

BAB I

PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Hidrogen sulfida (H_2S) merupakan gas beracun dengan toksisitas tinggi yang tidak berwarna, mudah terbakar, dan memiliki bau khas seperti telur busuk (Bhomick dan Rao, 2014). Namun, dalam konsentrasi tinggi, H_2S memiliki toksisitas akut yang serupa dengan hidrogen sianida (HCN) dengan cara menghambat kompleks IV rantai pernapasan mitokondria, yang dapat menyebabkan stres oksidatif, gangguan pernapasan, kerusakan organ dalam, dan bahkan kematian (Jiang dkk., 2016). H_2S sering ditemukan dalam berbagai industri, seperti pemurnian gas alam, kilang minyak, pabrik pulp dan kertas, serta produksi karbon disulfida, di mana keberadaannya dapat menimbulkan risiko kesehatan yang serius akibat sifat toksiknya (Mohammed dan Devi, 2021). Selain berasal dari aktivitas industri dan pembakaran bahan fosil, H_2S juga dilepaskan dari sumber alami seperti aktivitas vulkanik dan rawa-rawa. Tidak hanya berbahaya bagi manusia, gas ini juga berdampak negatif terhadap lingkungan, termasuk menghambat proses fotosintesis, memicu stres oksidatif pada tanaman, serta berkontribusi terhadap pembentukan hujan asam (Mukherjee dkk., 2025). Oleh karena itu, dalam jumlah besar, H_2S menjadi toksik bagi flora, fauna, dan manusia (H. Zhang, 2016).

Selain H_2S , sulfur dioksida (SO_2), juga merupakan polutan udara utama yang dihasilkan dari pembakaran bahan bakar fosil, kilang minyak, dan aktivitas industri lainnya (Tavella dkk., 2025). Gas ini lebih sering dikaitkan dengan gangguan pernapasan akut serta pencemaran udara. Secara geografis, wilayah

dengan konsentrasi emisi tinggi SO_2 global meliputi wilayah Tiongkok Timur, Dataran Indo-Gangetik, Amerika Serikat bagian timur, Eropa Barat, Timur Tengah, dan Afrika Selatan (Amritha dkk., 2024). Menariknya, selama masa lockdown COVID-19, tingkat polusi SO_2 tercatat menurun sebesar 2,21% secara global, yang menunjukkan besarnya peran aktivitas manusia dalam emisi gas ini. Selain membahayakan kesehatan, akumulasi SO_2 di atmosfer juga mempercepat proses terjadinya hujan asam, yang dapat merusak ekosistem alami serta infrastruktur (Asif dkk., 2025).

Seiring dengan pesatnya perkembangan industri, emisi gas berbahaya seperti H_2S dan SO_2 semakin meningkat. Hal ini menimbulkan tantangan besar dalam pemantauan dan pengendalian kualitas udara. Oleh karena itu, diperlukan teknologi sensor gas yang mampu mendeteksi keberadaan gas-gas beracun ini secara sensitif dan selektif untuk menjaga kualitas udara dan keselamatan lingkungan (Priya dkk., 2024). Sensor berbasis oksida logam umumnya digunakan karena harganya yang murah, namun memiliki kelemahan, yaitu bekerja pada suhu tinggi yang menyebabkan konsumsi energi yang besar (Yang dkk., 2024). Oleh sebab itu, diperlukan strategi untuk meningkatkan efisiensi sensor ini. Salah satu usaha yang telah dilakukan adalah dengan menyematkan logam mulia (Pd, Pt, Au, Ag) sebagai katalis, yang dapat menurunkan suhu operasionalnya dan meningkatkan sensitivitas sensor (Phung dkk., 2024).

Penggunaan logam mulia sebagai katalis memang mampu meningkatkan sensitivitas sensor, tetapi memiliki kelemahan dari sisi ekonomi karena harganya yang tinggi dan ketersediaannya yang terbatas. Oleh karena itu, diperlukan solusi

lain yang lebih ekonomis dan efisien. Sebagai alternatif yang lebih efisien dan inovatif, material 2D seperti grafena mulai mendapat perhatian dalam pengembangan sensor gas (J. Zhang dkk., 2021). Material grafena memiliki potensi besar dalam teknologi sensor gas karena sifatnya yang fleksibel, konduktivitas tinggi, serta stabilitas mekanik dan elektronik yang baik (Rocky dkk., 2024). Grafena juga dapat beroperasi pada suhu ruang dengan performa tinggi, menjadikannya alternatif menarik untuk menggantikan sensor berbasis oksida logam (Phung dkk., 2024). Namun, grafena memiliki beberapa keterbatasan, seperti stabilitas mekanik yang rendah dalam bentuk lapisan tunggal, interaksi yang lemah dengan gas target, serta band gap yang sangat kecil atau nol yang membatasi sensitivitas dan selektivitasnya (Phung dkk., 2024). Modifikasi grafena terbukti mampu meningkatkan kekuatan mekanis dibandingkan grafena tanpa modifikasi, karena perbaikan ikatan antarmuka dan distribusi grafena dalam matriks (Papageorgiou dkk., 2017). Eksperimen menunjukkan bahwa doping nitrogen (N) pada grafena meningkatkan sensitivitasnya terhadap gas sulfur dioksida (SO_2) secara signifikan. Sensor berbasis grafena lapis tipis yang didoping nitrogen (Gr/N) menunjukkan respon sebesar 29,9% terhadap 737 ppm SO_2 , jauh lebih tinggi dibandingkan grafena murni (Gr) yang hanya mencapai 15,9%. Selain itu, waktu respons Gr/N menurun dari 173 detik menjadi 113 detik, menandakan peningkatan kecepatan interaksi gas. Perhitungan DFT juga menunjukkan bahwa doping nitrogen meningkatkan transfer muatan antara grafena dan SO_2 , khususnya untuk situs graphitic-N dan pyrrolic-N yang masing-masing mentransfer $\sim 0,219$ dan $\sim 0,140$ elektron, dibandingkan hanya 0,022 elektron pada grafena murni. Hasil ini

menunjukkan bahwa doping nitrogen tidak hanya meningkatkan jumlah situs aktif tetapi juga memperkuat interaksi kimia, menjadikan grafena terdoping nitrogen sebagai kandidat unggul untuk aplikasi sensor gas SO_2 (Duan dkk., 2023). Selain itu, penanaman *in-plane* boron nitrida (BN) pada grafena juga menunjukkan peningkatan performa adsorpsi gas (Rocky dkk., 2024).

Penelitian lain juga telah mengusulkan penggunaan lapisan tambahan seperti heksagonal boron nitrida (h-BN) untuk meningkatkan stabilitas grafena, menghasilkan antarlapisan grafena/heksagonal boron nitrida (G/h-BN), tanpa mengganggu sifat elektroniknya. Struktur h-BN yang serupa dengan grafena, dengan kesalahan kisi hanya sekitar 1,78%, memungkinkan interaksi yang stabil antara keduanya serta meningkatkan performa sensor gas. Selain memberikan kestabilan mekanik, keberadaan lapisan h-BN juga menyebabkan terbentuknya celah pita kecil (~ 38 meV) dan peningkatan fungsi kerja grafena, yang berdampak positif terhadap kinerja adsorpsi gas. Studi teoritis menunjukkan bahwa antarlapisan G/h-BN dapat meningkatkan sensitivitas dan selektivitas sensor terhadap gas beracun seperti NO dan NO_2 melalui peningkatan energi adsorpsi dan perubahan muatan yang ditransfer, tanpa mengubah mekanisme fisisorpsi yang dominan. Oleh karena itu, struktur heterostruktur ini sangat menjanjikan untuk aplikasi sensor gas berbasis material dua dimensi (Phung dkk., 2024).

Performa sensor gas berbasis G/h-BN dapat ditingkatkan melalui rekayasa cacat kristal. Cacat seperti vakansi boron, vakansi nitrogen, dan penambahan logam mulia terbukti mampu menciptakan situs aktif baru yang memperkuat interaksi antara permukaan sensor dan molekul gas. Misalnya, dalam studi sebelumnya,

penyisipan atom Cu pada lokasi cacat dalam struktur G/h-BN menghasilkan peningkatan signifikan dalam energi adsorpsi dan respons listrik terhadap gas seperti NO₂, CO, NH₃, dan HCN (Shamsi, 2024). Menurut Riset yang dilakukan (Mondinos dkk., 2023), bahwa vakansi N dan B dalam monolayer h-BN secara signifikan mengubah sifat elektronik, meningkatkan polaritas serta energi adsorpsi terhadap molekul seperti CO, bahkan memungkinkan interaksi kemisorpsi dengan elemen seperti C, O, dan S yang beradsorpsi di situs cacat N atau B serta memengaruhi densitas keadaan dan transfer muatan secara substansial. Dengan demikian, pengendalian jumlah dan jenis cacat dalam struktur G/h-BN menjadi kunci dalam merancang sensor gas yang tidak hanya sensitif, tetapi juga selektif dan responsif dengan cepat.

Penelitian ini bertujuan untuk melakukan pemodelan komputasi menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) guna mengevaluasi efektivitas grafena dan antarlapisan G/h-BN sebagai sensor gas H₂S dan SO₂. Penelitian ini difokuskan pada sistem antarlapisan G/h-BN dengan modifikasi meliputi cacat kristal berupa kekosongan satu atom boron dan satu atom nitrogen. Pemodelan komputasi ini mencakup analisis energi cacat kristal serta studi terhadap pengaruh modifikasi tersebut terhadap mekanisme adsorpsi H₂S dan SO₂, yang menjadi indikator utama dalam kinerja sensor gas.

I.2 Tujuan Penelitian

1. Menentukan karakteristik interaksi antara grafena dan lapisan h-BN sebagai material sensor gas.
2. Menentukan kemampuan grafena/h-BN dalam mendeteksi gas H₂S dan SO₂.

3. Menentukan pengaruh cacat atom B dan N pada lapisan h-BN terhadap kemampuan deteksi gas H_2S dan SO_2 .